

Title	Direct Numerical Calculation on the Collective Motion of Model Microswimmers(Abstract_要旨)
Author(s)	Oyama, Norihiro
Citation	Kyoto University (京都大学)
Issue Date	2017-03-23
URL	https://doi.org/10.14989/doctor.k20415
Right	学位規則第9条第2項により要約公開; 許諾条件により要約は2018-03-23に公開; Phys. Rev. E 93, 043114 c2016 American Physical Society
Type	Thesis or Dissertation
Textversion	none

京都大学	博士（工学）	氏名	大山 倫弘（オオヤマ ノリヒロ）
論文題目	Direct Numerical Calculation on the Collective Motion of Model Microswimmers （粘性流体中を泳動する自走粒子の集団運動に関する直接数値計算による研究）		
（論文内容の要旨）			
<p>微生物を代表とする微小スケールの泳動体であるマイクロスイマーの分散系は非平衡統計力学の代表的な適用対象として理学的な興味を持たれているほか、ドラッグデリバリーシステム（DDS）や可変粘性液体材料の実現などへの工学的な応用も期待されている．マイクロスイマー分散系では明示的な運動の協調化メカニズムがなくとも、非自明な集団運動が観察され得ることが知られている．そうした集団運動は主に複雑な流体力学的相互作用の帰結であり、単粒子の運動の観察からは予測できないものである．上記工学的応用の実現に向けては予期せぬ効果を未然に予防するため、そうした集団運動特性を十分に理解することが求められる．実験的検討からマイクロスイマー分散系の統一的理解を獲得することは難しいが、一方でダイナミクスを対象にした理論的アプローチとしては遠場近似のもとでの線形安定性解析等が現状の限界であり、理解はいまだ不十分といえる．そこで、学位申請者は近場の効果も考慮に入れた解析を有効に行える直接数値計算を用いた研究を行った．マイクロスイマー分散系の動特性に関する数値計算的アプローチとして、スクイマーモデルと呼ばれる球形粒子モデルが広く用いられており、本研究でもこれを採用した．マイクロスイマーは、周囲に作り出す流れ場の特性から pusher, puller, neutral スイマーの三つのタイプに大別されるが、スクイマーモデルでは泳動タイプを与えるパラメータ（以下、泳動パラメータ）の調整によりこれらのスイマーを区別可能である．学位申請者は流体力学的相互作用を正確に考慮した三次元直接数値計算により、種々の環境でスクイマー分散系が示す集団運動特性の研究を行った．本学位論文では、「バルクにおける方向秩序形成」、「平行平板間での進行波状特異的集団運動」、「パイプ内方向秩序形成」の三つの成果についてまとめた．以下に、各章の概要を示す．</p> <p>第二章では、「バルクにおける方向秩序形成」をテーマとした研究結果をまとめた．スクイマー分散系が示す集団運動のうち代表的なものが、自発的に泳動方向が整列する、方向秩序の形成である．秩序の程度は方向秩序パラメータ P によって定量的に評価される．バルクでは系を決定づけるパラメータは少なく、P は体積分率および泳動パラメータのみの関数であることが知られている．先行研究ではこのうち、体積分率依存性はごく微弱であることを示していた．本研究ではこれまでに検討がなされていない広いパラメータ領域を対象に方向秩序関数の測定を行い、各パラメータ依存性について網羅的検討を行った．その結果、泳動パラメータの値ごとに、体積分率依存性は定性的に異なる振る舞いをし、パラメータによってはこれまでに報告されていたよりも強い体積分率依存性が存在することがわかった．一方で、少なくとも低体積分率領域では方向秩序の定性的な泳動パラメータ依存性の傾向は一定といえる．そこで、さらにこうした方向秩序の形成がどの程度二体衝突のみで説明可能かを検証するために、簡易化された二体衝突モデルの構築を行った．得られたモデルは広い泳動パラメータの範囲に対し、精度良くバルクで見られる方向秩序の値を再現した．しかし、特定のパラメータ領域（以下、中程度 Puller と呼ぶ）では本モデルによっては秩序が形成されなかった．本結果は中程度 Puller 分散系では、多体衝突の影響が無視できないことを示すと解釈できる．実際、中程度 Puller においては先行研究で強いクラスタ形</p>			

京都大学	博士（工学）	氏名	大山 倫弘（オオヤマ ノリヒロ）
<p>成傾向が報告されている．そうしたクラスタが方向秩序形成に重要な役割を果たしている可能性が示唆された．</p> <p>第三章では、「平行平板間での進行波状特異的集団運動」をテーマとした研究結果をまとめた．最終的に DDS 等への応用を考えるならば，輸送現象を理解するのは重要であり，輸送に伴う壁面による集団運動特性への影響を理解する必要がある．平行平板間に封入した系の密度分布などの静的な性質はすでに調べられており，壁面堆積効果が存在することなどが知られていた．本研究では観察対象を動的性質に拡張し，検討を行った．結果，壁面の大きさが十分大きな領域では，中程度 Puller 分散系が，これまでに報告のない進行波状の特徴的な集団運動が観察されることを明らかにした．定性的に類似した現象は，より簡易化されたモデルを用いた系で報告されているものがあったが，流体力学的相互作用を完全に考慮した agent-based mode でもこうした現象が観測されることを実際に示した例は，本研究が初めてである．中程度 Puller 分散系では，上述の通り，バルクでのクラスタ形成が知られており，今回観察された進行波状の現象も起源を同じくしている可能性が考えられる．本仮定の検証のため，別途バルク系での大規模数値計算を実行し，両系における集団運動の特徴量の比較を行った．比較に用いる特徴量として，集団の見かけ速度を採用した．平板間では進行波の速度の方向は既知のため，速度は一意に決定・測定可能である．バルクでは動的構造因子の測定により，音波物性の検出を試み，得られた音速を集団運動の特徴速度とした．通常の passive コロイドに対して動的構造因子を測定しても音波物性は得られないが，スクイマー系では自走性の影響で期待通り音波物性が検出された．さらに，得られた音速の値と，壁面間における進行波の伝播速度を比較すると，両者は定量的に一致していることがわかった．本結果により，今回報告した特異的な現象がバルク系の持つ本来的な性質の顕在化である可能性が示唆される．</p> <p>第四章では、「パイプ内に封入された自走粒子系の方向秩序形成」をテーマとした研究結果をまとめた．パイプ内では壁面堆積効果の影響などで方向秩序の値はバルクと異なりうるということがわかった．影響の現れ方は泳動パラメータや体積分率による異なるが，それぞれの場合における秩序関数の値の変化の理由は，構造解析により半定量的に理解できた．また，本研究では網羅的な検討のために，パイプ径依存性および，断面形状依存性も調べた．結果，方向秩序の観点からはパイプ径依存性は基本的には存在しないことがわかった．しかし，一部のプレーに関してのみ，パイプ径の縮小に伴い秩序相—無秩序相転移が観察されることがわかった．興味深いことに，ここで相転移が観察された泳動パラメータの値の範囲は，二体衝突モデルが有効でなかった範囲，平行平板間で進行波状の特徴的な集団運動が観察された範囲と同じ中程度 Puller であった．中程度 Puller について，方向秩序のパイプ径依存性をより詳細に調べると，ある値を境に急激な変化を示すことがわかった．この結果は，中程度 Puller 分散系において方向秩序を維持するために必要な最小サイズのクラスタが存在する可能性を示唆しているものと考えられる．バルクの構造も測定し，特徴クラスターサイズの特定を試みたが，残念ながら従来 of 動径分布関数ではそうしたサイズの定量的特定はできなかった．</p> <p>第五章には，二章～四章の総括および，今後の展望を記した．申請者の研究において，進行波状の特徴的な集団運動や秩序相—無秩序相転移といった壁面に封入された系が示す特異的な振る舞いはバルクのクラスタ形成傾向と深く結びついている可能性が示唆された．これらの現象はこれまで得られていたバルクにおける知見からは予測</p>			

京都大学	博士（工学）	氏名	大山 倫弘（オオヤマ ノリヒロ）
不可能なものであるが，本研究の結果からバルク特性のさらなる理解により，これらの特異的な現象の理解が深まる可能性を示唆できた．こうした知見を定量的に提示できたことは本学位論文の主要な成果と位置づけられ，関連研究分野において新たな指針を与える役割を果たすものである．			

(論文審査の結果の要旨)

マイクロスイマー分散系は、非平衡統計力学のモデル系として理学的な興味を持たれているほか、工学的な応用も期待されている。スイマーは、周囲に作り出す流れ場の特性から Pusher/ Neutral/Puller の 3 タイプに大別されるが、本研究で用いたスクイマーモデルでは、球状粒子表面での流体速度の境界条件を決めるパラメータ α を、それぞれ $- / 0 / +$ に設定することにより、この 3 タイプを実現する。本論文では、マイクロスイマーの集団運動が示す特異な性質とその機構を理解するために、大規模な直接数値シミュレーションを用いた研究を行った。以下にその概要を記す。

1) これまでに検討がなされていない広いパラメータ領域を対象に、泳動方向の秩序変数の測定を行った。その結果、 α の値ごとに秩序変数の体積分率依存性は異なる振る舞いをし、これまでに報告されていたよりも強い体積分率依存性が存在することを明らかにした。さらに、この方向秩序形成の機構を調べるために二体衝突モデルによる検討を行ったところ、クラスタ形成傾向を示す特定の α 値の領域（中程度 Puller 領域）では、多体効果が無視できないことがわかった。

2) 平行平板間に封入された多数のスクイマーに対して直接数値計算を行い、中程度 Puller 領域において、これまでに報告のない進行波状の特徴的な集団運動が観察されることを見出した。さらにバルク系での大規模数値計算を別途実行し、動的構造因子の測定によりスクイマーの密度波の速度（音速）の計測に成功した。得られた音速の値と並行平板間における進行波の伝播速度を比較すると、両者は定量的に一致した。この結果は、バルク系が潜在的に有するスクイマーの密度波が平板間への封入によって顕在化し、進行波状の特異な集団運動として観察されるという可能性を強く示唆するものである。

3) 円管内に封入された自走粒子系に対して直接数値計算を行い、管内では壁面堆積効果の影響などで方向秩序の値がバルクと異なりうることを明らかにした。影響の強さは α の値や体積分率に依存するが、それぞれの場合において秩序関数の値が変化する機構を半定量的に理解することに成功した。また、管径・断面形状依存性を調べ、一般的には方向秩序の管径依存性は弱いものの、中程度 Puller 領域では強い依存性を示すことがわかった。この結果は、中程度 Puller の分散系においては、方向秩序を維持するためにはある大きさ以上のスイマー集団を必要とする可能性を示している。

以上、本論文は、新しいシミュレーション手法の構築に加えて、非圧縮性溶媒中で自発的に運動するマイクロスイマー集団の挙動に関して新たな知見を多く含んでおり、学術上、實際上寄与するところが少なくない。よって、本論文は博士（工学）の学位論文として価値あるものと認める。また、平成 29 年 2 月 17 日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行って、申請者が博士後期課程学位取得基準を満たしていることを確認し、合格と認めた。

なお、本論文は、京都大学学位規程第 14 条第 2 項に該当するものと判断し、公表に際しては、当該論文の全文に代えてその内容を要約したものとすることを認める。